

А. В. Маркидонов

Филиал Кузбасского государственного технического
университета имени Т. Ф. Горбачева, г. Новокузнецк
markidonov_artem@mail.ru

ИССЛЕДОВАНИЕ МЕХАНИЗМОВ РОСТА ЗЕРЕН КРУЧЕНИЯ В УСЛОВИЯХ ВЫСОКОИНТЕНСИВНОГО ВНЕШНЕГО ВОЗДЕЙСТВИЯ

Методом молекулярной динамики проведено исследование влияния ударных послекаскадных волн на процесс миграции границы зерен наклона. Показано, что существует два атомарных механизма миграции границы: кооперативный поворот группы атомов и локальная аморфизация структуры с последующей кристаллизацией на втором зерне. Доминирование каждого из механизмов зависит от угла разориентации зерен.

Ключевые слова: молекулярная динамика, метод погруженного атома, ударная волна, граница зерен наклона, кооперативные смещения, локальная аморфизация.

A. V. Markidonov

INVESTIGATION OF THE MECHANISMS OF GROWTH OF TORSION GRAINS UNDER CONDITIONS OF HIGH-INTENSITY EXTERNAL ACTION

The molecular dynamics method was used to study the effect of shock after-cascade waves on the migration of the grain boundary of the slope. It is shown that there are two atomic mechanisms of boundary migration: cooperative rotation of a group of atoms and local amorphization of the structure followed by crystallization on a second grain. The dominance of each of the mechanisms depends on the angle of misorientation of the grains.

Key words: the method of molecular dynamics, embedded atom method, the shock wave, the twist grain boundary, cooperative displacement, local amorphous.

Целью представленной работы является определение с помощью метода молекулярной динамики атомных механизмов миграции границ зерен кручения в моделируемом кристалле никеля под воздействием ударных послекаскадных волн. Данные волны формируются в твердом теле под воздействием потока высокоэнергетических частиц в результате скачка давления в каскадной области, образующегося из-за различий времени термализации атомных колебаний в некоторой конечной области и времени отвода из нее тепла [1].

Исследование проводилось с помощью пакета XMD [2]. В качестве потенциальной функции межатомного взаимодействия использовался потенциал Джонсона, рассчитанный в рамках метода погруженного атома [3]. Температура расчетной ячейки задавалась путем присвоения атомам случайных скоростей, а для ее сохранения использовался пропорциональный термостат. Шаг численного интегрирования уравнений движения равнялся 5 фс. Компьютерный эксперимент проводился на расчетной ячейке, состоящей из 20 000 атомов. Для создания волны в расчетной ячейке выделялась кристаллографическая плоскость (1–10), содержащая единичный слой граничных атомов, которым присваивалась равная по величине скорость, превышающая скорость продольных звуковых волн, и вектор которой ориентирован по нормали к выделенной плоскости. В результате последующих эстафетных кооперативных атомных смещений формируется бегущая волна, ширина фронта которой не превышает нескольких межатомных расстояний, а амплитуда смещений атомов значительно превышает, например, амплитуду тепловых колебаний.

Для создания границы зерен кручения расчетная ячейка разбивалась на два блока, которые поворачиваются в противоположные стороны относительно друг друга на некоторый угол $\mu/2$ вдоль оси X, перпендикулярной плоскости создаваемой границы. Геометрия расчетной ячейки сохранялась комбинацией жестких и периодических граничных условий.

Проведенное исследование показало, что разогрев расчетной ячейки вплоть до температуры, близкой к температуре плавления, не вызывает структурных изменений в зернограничной области моделируемого кристалла. Кроме того, конфигурация границы кручения не меняется и при создании в структуре нормальных напряжений, принадлежащих интервалу упругих деформаций.

Ударные волны, генерируемые в расчетной ячейке, пересекают зернограничную область, не вызывая в ней структурных преобразований. В случае же если расчетная ячейка подвергается деформации растяжения (одноосной или всесторонней) и осуществляется ее нагревание (поддерживаемая температура не ниже половины температуры плавления), то наблюдается миграция границы под воздействием волн по направлению к их источнику, в результате чего осуществляется рост одного из зерен. Отметим, что в отличие от границ зерен наклона для миграции границы зерен кручения в проводимых экспериментах не требовалось наличие точечных дефектов в зернограничной области.

Увеличение числа генерируемых ударных волн приводит к большому росту зерна. Так, на рис. 1 представлены срезы атомных плоскостей расчетной ячейки, демонстрирующие последовательный рост зерна. Отметим, что полному повороту атомной плоскости препятствует использование жестких граничных условий.

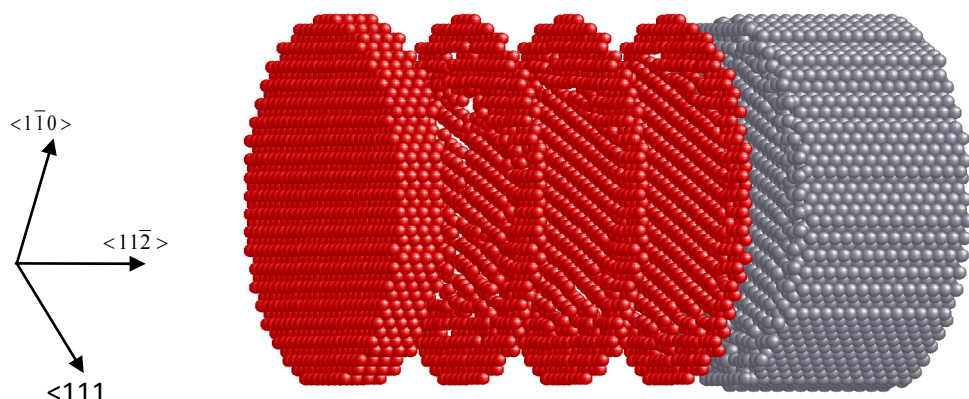


Рис. 1. Срезы плоскостей $(1-10)$ одного из зерен расчетной ячейки после прохождения четырех ударных волн, генерируемых через 2,5 пс вычислений, при всесторонней деформации расчетной ячейки ($\mu = 20^\circ$), равной по величине 4 %. Поддерживаемая температура системы равна 900 К

Исследование показало, что существует два атомистических механизма миграции границы. При малых углах разориентации миграция осуществляется путем кооперативных смещений групп атомов вдоль ядер зернограницных дислокаций. Данный процесс приводит к повороту атомной плоскости на угол μ . Схожий механизм поворота зерен, наблюдаемый при наноиндентировании, описан в работе [4].

Для большеугловых границ зерен, когда ядра дислокаций начинают перекрываться, доминирующим механизмом миграции границ зерен становится локальная аморфизация структуры, возникающая при прохождении ударной волны по зернограницной области, с последующей повторной кристаллизацией на втором зерне. Для подтверждения этого предположения была рассчитана радиальная функция распределения атомов, принадлежащих зернограницной области зерна, в котором генерируются волны. Построенные зависимости показывают, что волны вызывают разупорядочение атомной структуры. Подобный механизм миграции высокоугловой границы зерен, но проявляющийся при приложении к границе относительно большой движущей силы, описан в работе [5].

Таким образом, проведенное исследование показало, что под воздействием ударных послекасадных волн возможна миграция границ зерен наклона по направлению к их источнику. При этом расчетная ячейка, содержащая границу, должна быть подвергнута нагреву и деформации растяжения. В отличие от рассмотренных ранее процессов миграции границ зерен наклона в проводимых экспериментах не требовалось наличие в зернограницной области точечных дефектов. При малых углах разориентации зерен доминирующим механизмом миграции является кооперативный поворот группы атомов, а при больших углах — локальная аморфизация с последующей кристаллизацией на соседнем зерне.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 18-42-220002 p_a.

ЛИТЕРАТУРА

- 1 Овчинников В. В. Радиационно-динамические эффекты. Возможности формирования уникальных структурных состояний и свойств конденсированных сред. Успехи физических наук. 2008. Т. 178. № 9. С. 991—1001.
- 2 XMD — Molecular Dynamics for Metals and Ceramics [Electronic resource]. URL: <http://xmd.sourceforge.net/about.html>.
- 3 Johnson R. A. Analytic Nearest-Neighbor Model for FCC Metals. Physical Review B. 1988. V. 37. № 8. P. 3924—3931.
- 4 Sansoz F., Dupont V. Grain growth behavior at absolute zero during nanocrystalline metal indentation // Applied Physics Letters. 2006. V. 89. № 11. P. 111901.
- 5 Schönfelder B. Molecular-dynamics method for the simulation of grain-boundary migration / B. Schönfelder [et al.] // Interface Science. 1997. V. 5. № 4. P. 245—262.